



TITLE:

# 金属材料の表面特性

AUTHOR(S):

袴田, 昌高

---

CITATION:

袴田, 昌高. 金属材料の表面特性. 京都大学化学研究所スーパーコンピュータシステム研究成果報告書 2020, 2019: 50-50

ISSUE DATE:

2020-03

URL:

<http://hdl.handle.net/2433/251130>

RIGHT:

金属材料の表面特性

Surface properties of porous metals

京都大学大学院エネルギー科学研究科 袴田 昌高

研究成果概要

ナノポーラス金はナノメートルオーダーのポアとリガメントを有する多孔質な金であり、近年新たなバイオマテリアルとして注目されている。ナノポーラス金表面には多数の格子ひずみが分布しており特異な表面電子状態を形成している。ナノポーラス金表面は大腸菌に対して強い抗菌性を示し<sup>1,2)</sup>、また HeLa 細胞に対してはアポトーシス(自発死)を誘導することが示されている。この機序は、金ナノ粒子等に見られる細胞核への直接的作用ではなく、インテグリンと呼ばれる膜貫通タンパクを介して 細胞シグナル伝達に影響し、間接的に核へと作用すると考えられているが、その詳細は明らかにされていない。

ナノポーラス金とインテグリンの相互作用を原子・電子レベルで解析するために、密度汎関数法による第一原理計算と分子動力学(MD)を連携させたシミュレーション計算を実施した。初めに、インテグリンのリガンドタンパクであるフィブロネクチンの RGD アミノ酸配列を ナノポーラス金表面モデル<sup>1,2)</sup>上に配置し、第一原理計算による構造緩和(Materials Studio)を実行した。次に、ナノポーラス金により構造変化した RGD をフィブロネクチン-インテグリン複合体へと置換して分子動力学計算(NAMD)を実行した。比較のため、同様の計算を平滑金(バルク金)モデルに対して実行した。電子状態およびタンパク質の構造変化を解析するために、電子状態密度解析や主成分分析(PCA)、自由エネルギー計算を行った。

第一原理計算による構造最適化の結果、平滑金上では RGD の大きな構造変化は見られなかったが、ナノポーラス金上では構造が大きく湾曲した。金原子と RGD 側鎖酸素原子間の電子状態密度を調べた結果、ナノポーラス金上では共有結合性のピークが同一エネルギー準位に生じたが、平滑金上では確認されなかった。MD 計算で得られたインテグリンのトラジェクトリーを PCA 平面(主部分空間)上に射影し、カーネル密度推定法による自由エネルギー地形の解析を行った。平滑金上では二つのエネルギー安定状態が存在し、これはインテグリンの closed 構造(不活性状態)と open 構造(活性状態)に対応していた。一方、ナノポーラス金上では closed 構造の自由エネルギーが低下し、closed 構造がより安定化している。以上のことから、ナノポーラス金上では細胞外から細胞内部へのインテグリンシグナル伝達を正常に行えず、結果として細胞の生存維持が妨げられたことが示唆される。

参考文献：1) N. Miyazawa et al., Sci. Rep. **8** (2018) 3870.

2) N. Miyazawa et al., Sci. Rep. **9** (2019) 1091.

発表論文：S. Deguchi, M. Hakamada, J. Shingu, S. Sakakibara, H. Sugiyama, M. Mabuchi, "Inactivation of HeLa cells on nanoporous gold", Materialia **7** (2019) 100370.